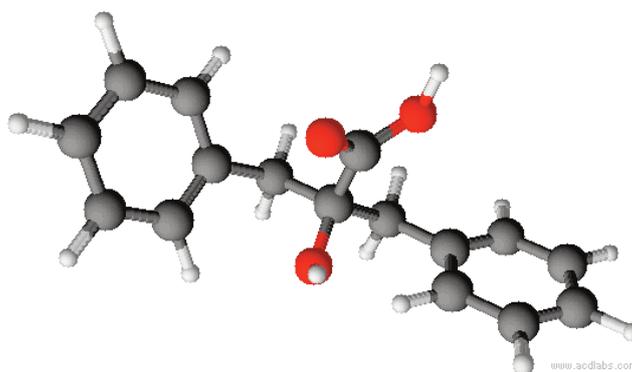


# Chemsketch - Tutorials

W. Hölzel

## Teil 1

1. Download und Installation
2. Chemsketch einfach einrichten



# Einleitung

**D**ieses Tutorial wurde erstellt, um die ersten Schritte, die sich meist als die frustrierendsten herausstellen, möglichst einfach zu machen.

Da ich mir das Programm so nebenher selbst beigebracht habe und meine Englischkenntnisse eindeutig rudimentär sind, erhebt dieses Tutorial weder den Anspruch auf Vollständigkeit noch das der vorgeschlagene Weg der richtige ist. Ich bin für jeden Hinweis und Verbesserungsvorschlag für dieses Tutorial dankbar. Hinweise bitte an: [w.hoelzel@gmx.de](mailto:w.hoelzel@gmx.de).

Ich wünsche viel Spaß bei Chems sketch,

W. Hölzel

# Hinweise

Die Schriftgröße wurde so gewählt, dass man auch bei Verkleinerung der Seite sie noch lesen kann.. Zur Bearbeitung der Tutorials bietet es sich an, das ChemsSketchfenster auf der linken Seite zu platzieren und auf der rechten Seite das pdf-Dokument, so dass man nicht immer zwischen den Fenstern hin und her wechseln muss.

Bei den Bildschirmfotos habe ich mit Hilfe von Gimp versucht die unnötigen Bereiche aufzuhellen, so dass sie zwar sichtbar sind, aber in den Hintergrund rücken. Das führt aber dazu, dass natürlich die Bildschirmabbildungen nicht mit eurem Bildschirm übereinstimmen.

Die grünen Kästen an der Seite sollen das schnelle Arbeiten erleichtern. Hier sind die aufeinanderfolgenden Schritte so kurz wie möglich dargestellt, so dass man beim erneuten Arbeiten nicht nochmals den ganzen Text durchzulesen hat.

Dieses Machwerk „steht unter“ Creative Commons.

- ACDLABS 11.0
- ChemSketch

# Installation

## 1. Schritt: Download

Chemsketch kann man unter folgender Seite herunterladen:

<http://www.acdlabs.com/download/>

Wie man auf dieser Seite sieht, besteht das Hauptprogramm aus mehreren Modulen. Das Hauptmodul ist ACD/Chemsketch 11 (Stand Okt. 08) und reicht für unsere Zwecke.

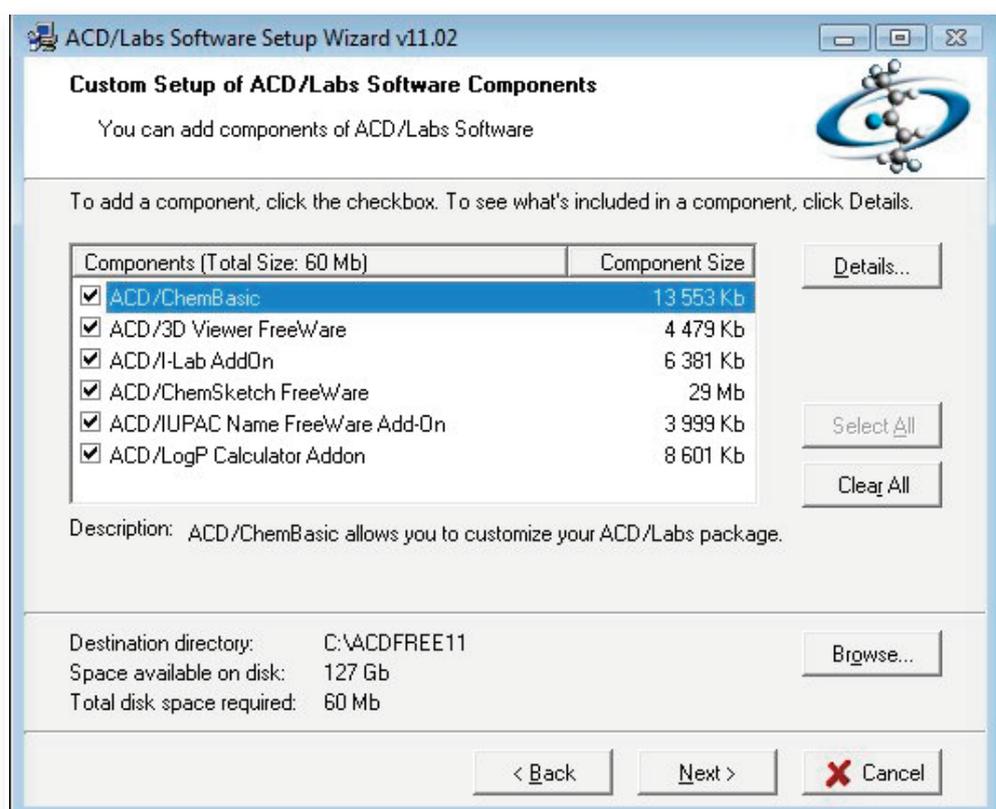
Leider muss man sich für das Programm registrieren, ist aber für den privaten Gebrauch kostenlos.

- <http://www.acdlabs.com/download/>
- chemsk11.exe

Wer wie viel von den Zusatzmodulen benötigt muss jeder für sich entscheiden. Das Standardprogramm hat schon alles nötige. Es reicht also, wenn man „All in One“ **chemsk11.exe** runterlädt.

## 2. Schritt: Installation

Mit einem Doppelklick auf **chemsk11.exe** beginnt die Installation. Nach des Akzeptierens der **Lizenz** kann man auswählen, welche Module man installieren möchte. Ich installiere immer alle.



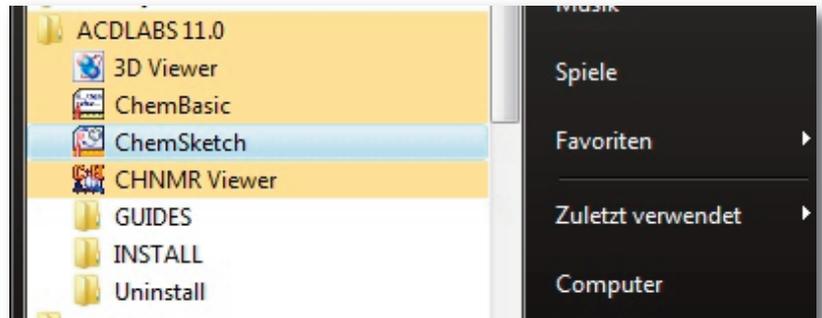
Im folgenden klickt man einfach auf „Next“, sofern man keine Änderungswünsche hat.

# Programmstart

## 1. Schritt:

Das Programm versteckt sich hinter dem Ordner **ACDLABS 11.0**. Öffnet man diesen Ordner, so finden sich 4 Programme.

- ACDLABS 11.0
- ChemSketch
- 3 x Yes (Aktivieren / Deaktivieren)

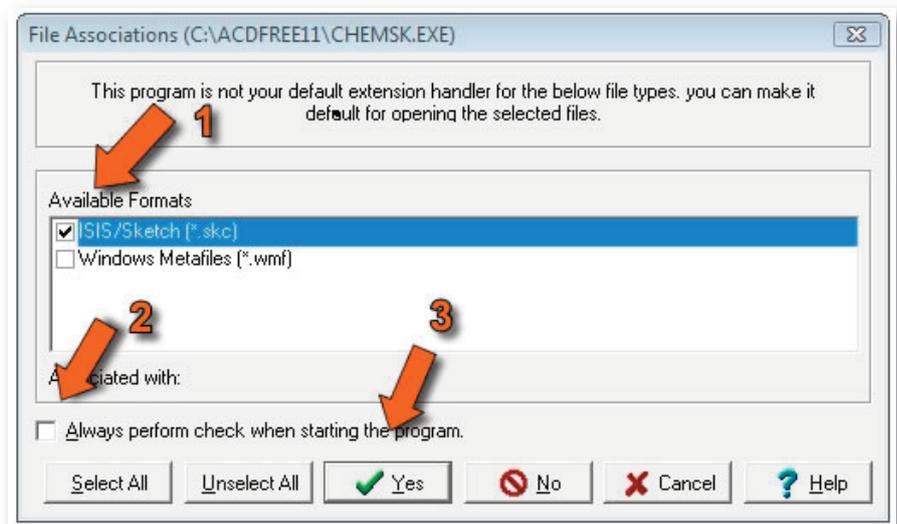


## 2. Schritt:

Für unseren Fall reicht **ChemSketch** aus. Die anderen Programme lassen sich direkt aus dem Hauptprogramm **ChemSketch** starten.

## 3 Schritt:

Beim ersten Start kommt nach dem Begrüßungsbildschirm erst einmal die Frage, ob und welche Dateien mit ChemsKetch verknüpft werden sollen.

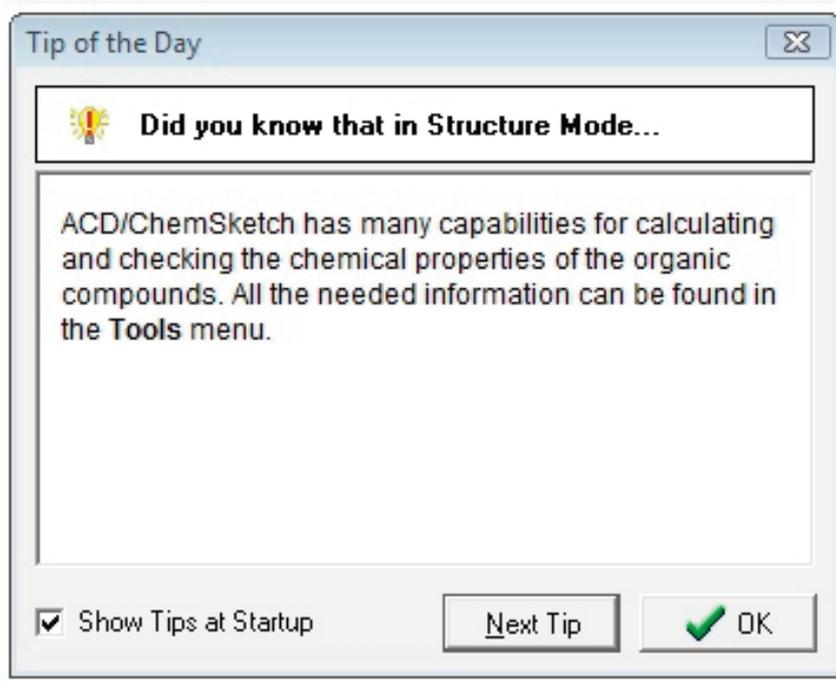


Dateien anderer Programme (wie z.B. ISIS/Sketch) können dann verknüpft, wenn man in Zukunft diese Dateien immer mit ChemsKetch öffnen möchte.

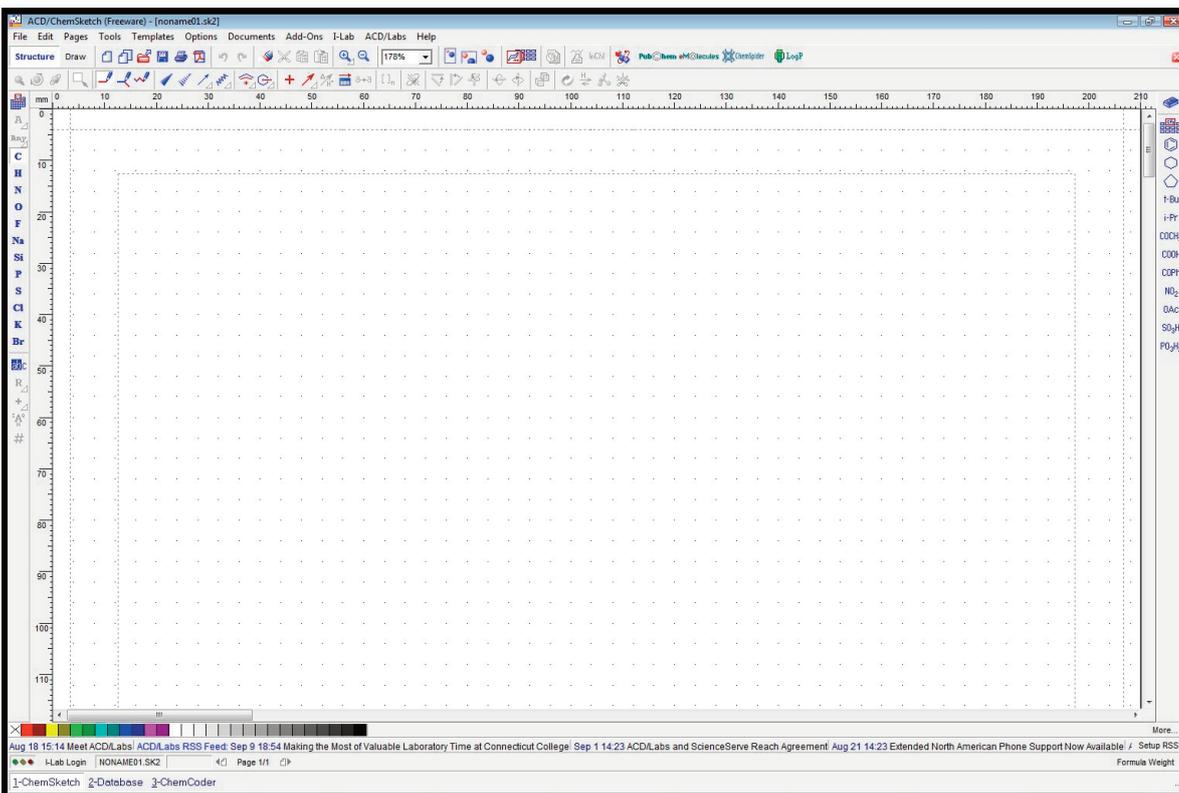
- 1 Unter „**Availables Formats**“ gewünschtes wählen.
- 2 Wichtig ist, dass man **2** deaktiviert, ansonsten bekommt man diese Frage immer wieder gestellt.
- 3 Mit „**Yes**“ geht es weiter.

Zum Schluss öffnet sich das „**Tip of the day**“. Wer nicht wie ich zu faul ist zum Lesen, bekommt bestimmt den einen oder anderen guten Hinweis.

## 4. Schritt:



Jetzt müsste das folgende Programmfenster in seiner ganzen Pracht vor euch geöffnet sein. Die meisten Funktionen kenne ich auch nicht; die paar anderen werden nun in den folgenden Seiten erklärt.

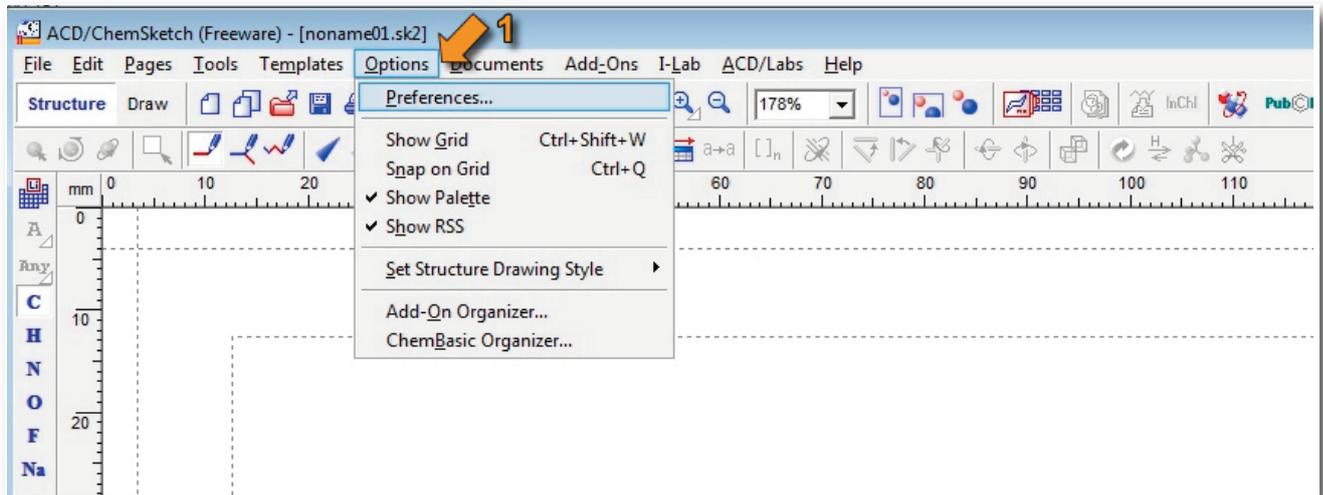


# ChemsSketch einrichten

## 1. Schritt: Bindungslänge und Winkel

Man hat es wesentlich einfacher, wenn man gleich folgende Änderung vornimmt:

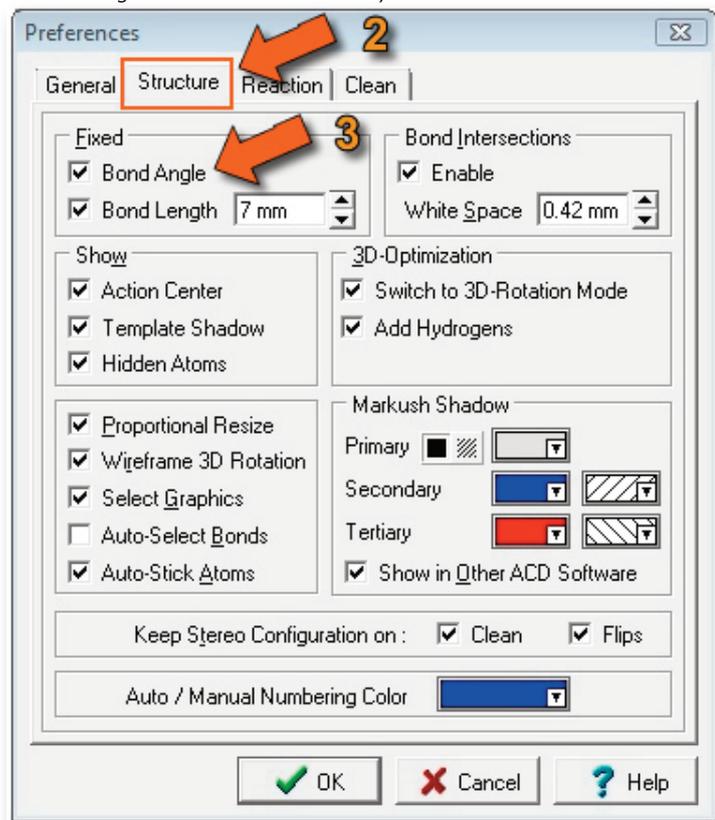
1 Man öffnet unter Menü → **Options** → **Preferences**.



2 Man markiert den zweiten Reiter „**Structure**“.

3 Unter „**Fixed**“ aktiviert man „**Bond Angle**“ und „**Bond Length**“. Dadurch sind die Bindungswinkel und Bindungslänge fixiert (*keine Angst, die Winkel sind noch klein genug (12°?), aber senkrechte und waagrechte Striche gehen dadurch viel leichter*).

- Optionen
- Preferences
- Struktur
- Bond Angle + Bond Length

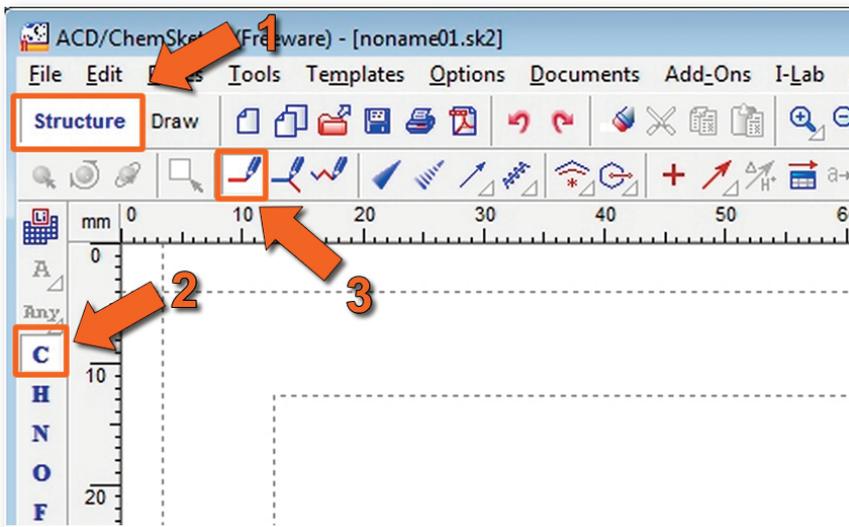


Hinweis: Wenn man gleichzeitig „**Shift-Taste**“ beim zeichnen drückt, dann sind Bindungswinkel und Bindungslänge beliebig wählbar.

Zunächst soll ein Propan gezeichnet werden:

Dabei müssen folgende 3 Reiter bzw. Buttons markiert sind:

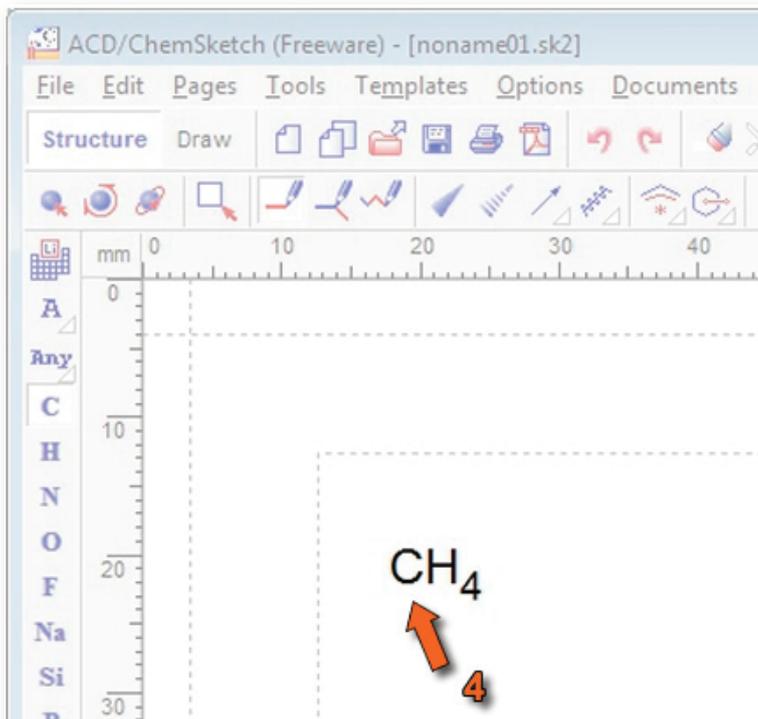
- 1 **Structure** (es soll ja ein Molekül gezeichnet werden);
- 2 **C** Die Struktur beruht auf Kohlenstoffatome;
- 3 Und wir wollen **einfache Bindungen (Draw Normal)** zeichnen.



- aktivieren von „Structure“
- aktivieren von „C“
- aktivieren von „draw normal“
- linke Maustaste auf weißes Blatt
- auf Methan klicken und ziehen
- auf Ethan klicken und ziehen
- Propan zeichnen
- „Select/Move“ aktivieren
- Doppelklick auf Molekül
- „Properties“ bearbeiten
- „Common“
- „Show Carbon“ → „All“
- „Apply“
- „Set Default“
- Unter eigenen Namen Speichern

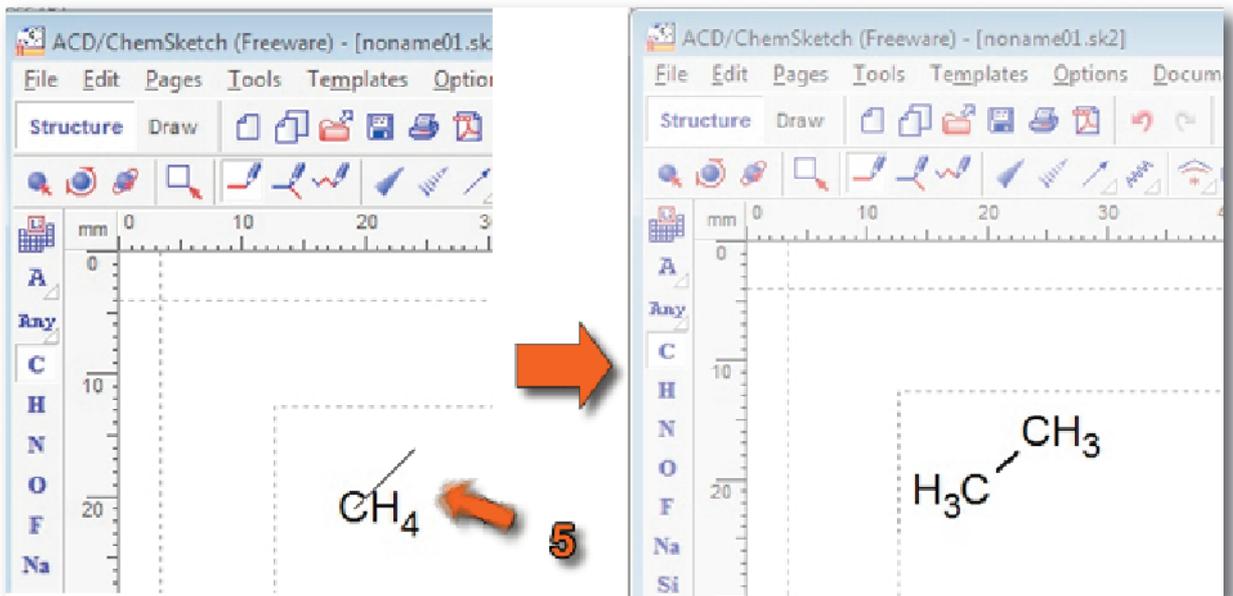
Für das Propanmolekül müssen drei C-Atome gezeichnet werden.

4 Man **klickt** mit der **linken Maustaste** einmal auf das „weiße Blatt“ - es müsste dort ein Methan in Halbstrukturschreibweise stehen.



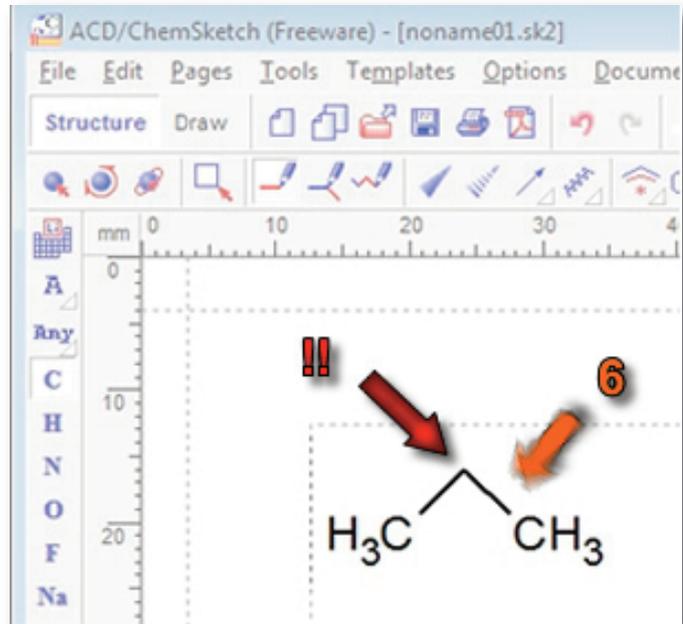
## 2. Schritt: Ethan zeichnen

5 Man **zieht** dann mit **gedrückter linker Maustaste** vom Methan nach links oben bis zum ersten Rasterpunkt und **lässt** dann **los**. Alternativ kann man auch einfach auf Methan klicken, allerdings hat man dann weniger Einflussmöglichkeiten auf den Ort des zugefügten Kohlenstoffatoms.



## 3. Schritt: Propan zeichnen

6 Wie unter 5 beschrieben zeichnet man jetzt ein Propanmolekül, indem wir auf das Ethanende oben rechts **klicken** und nach unten rechts eine weitere Bindung **ziehen**.



Hinweis: Wie man sehen kann, werden die C-Atome im Molekül nicht richtig angezeigt. Das kann man aber ganz einfach ändern.

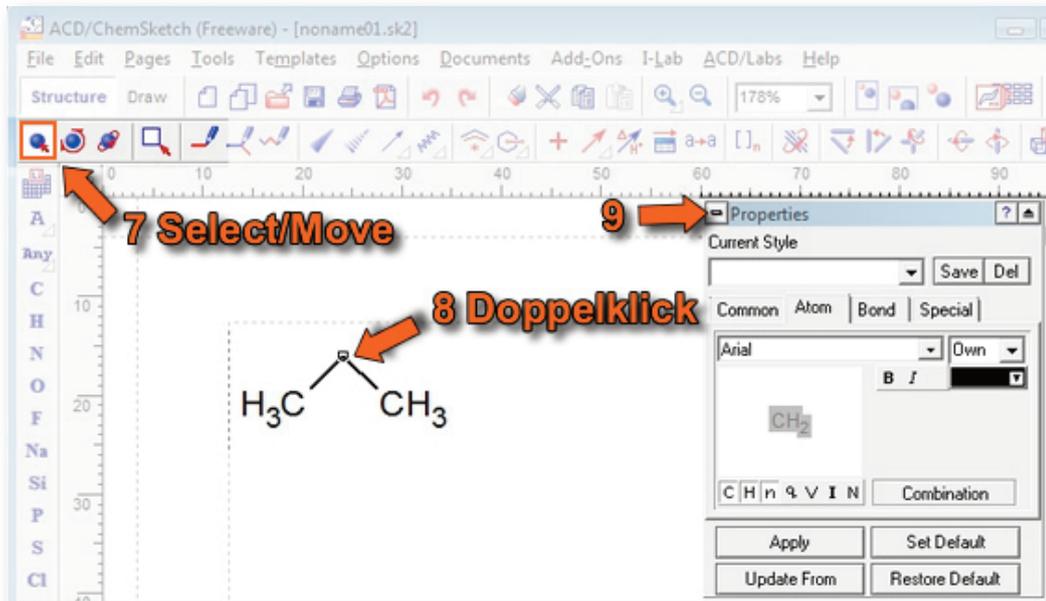
Jetzt wird es ein wenig ungewohnt:

**7** Als erstes muss man in den **Select/Move** Modus wechseln.

## 4. Schritt: C-Atome anzeigen

**8** Dann genügt ein **Doppelklick** auf das **Molekül** (z.B. auf das mittlere nicht vorhandene C-Atom) und

**9** ein neues Fenster mit „**Properties**“ geht auf.



Hinweis: Mit Hilfe des Properties-Fensters kann man wichtige Angaben einstellen, so auch Valenzen und vor allem Ladungen. Es ist wichtig, dass ihr euch merkt, wie man zu diesem Fenster kommt.



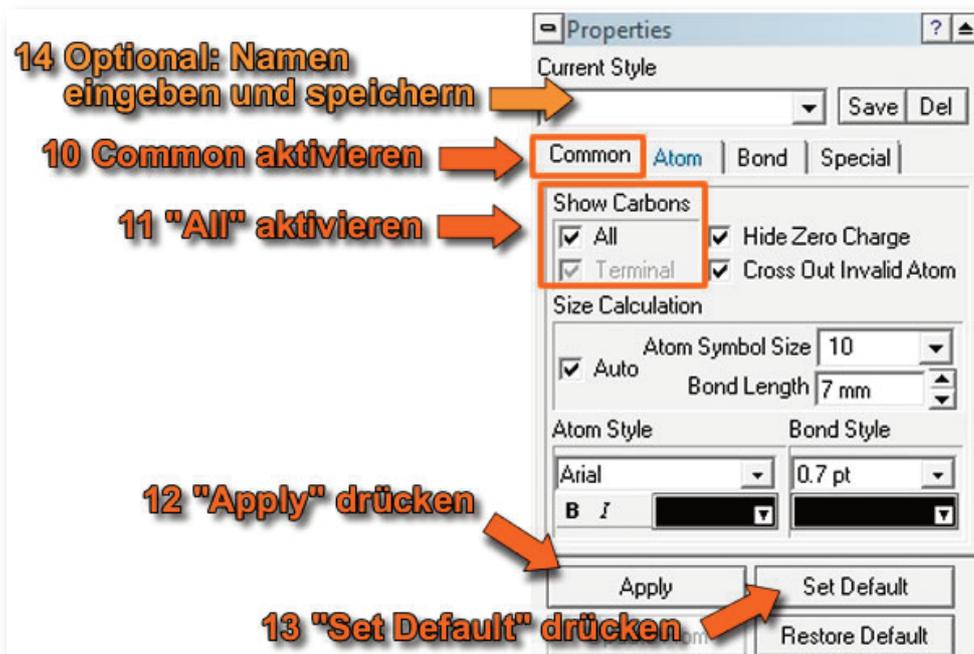
**10** „**Common**“ Reiter aktivieren;

**11** „**Show Carbons**“ → „**All**“ aktivieren;

**12** „**Apply**“ drücken → Änderung wirkt sich auf markiertes Molekül aus;

**13** „**Set Default**“ drücken → C-Atome werden immer angezeigt;

**14** Optional kann man seine Einstellung unter einem Namen speichern.



Damit hätten wir die zunächst einmal die wichtigsten Grundlagen für das schnelle Zeichnen von organischen Molekülen gelegt. Im nächsten Teil werden dann ein paar Moleküle gezeichnet.